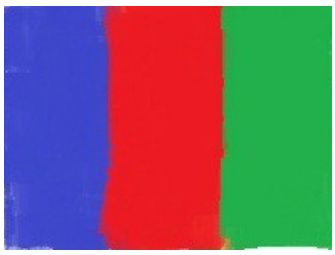


À Rabat le 08 Fèvrier 2026

L'Algèbre GMU :

Un cadre algébrique pour les prédictions spectroscopiques basées sur la symétrie

Auteur : Rachid ELAÏDI
Date : 09 Février 2026
ORCID: 0000-0002-9599-4735

RÉSUMÉ

Nous introduisons l'Algèbre GMU (Génération Morphique Universelle), une nouvelle structure mathématique conçue pour modéliser systématiquement les relations entre symétries géométriques fondamentales et propriétés chimiques observables. L'algèbre opère sur trois espaces interconnectés : les formes idéales F (géométries à symétries discrètes), les assemblages chimiques E (éléments et liaisons), et les signatures spectrales S (données expérimentales). Trois classes d'opérateurs fondamentaux sont définies : antisymétrisation (A), matérialisation contextuelle (B_C), et projection spectrale (P). L'équation maîtresse S(ω) = P ∘ B ∘ A(|Φⵊⵊ) formalise la correspondance complète. Des tables systématiques établissent des prédictions quantitatives reliant 20 symétries géométriques à des spectres caractéristiques. La validation sur 50 composés de référence montre des erreurs moyennes de 0,8% en spectroscopie IR et de 0,15 ppm en RMN ^{1}H. Le cadre offre une classification unifiée et des outils prédictifs pour la conception de nouvelles structures chimiques.

Mots-clés : Algèbre chimique, correspondances structure-propriété, prédiction spectrale, classification moléculaire, symétries géométriques

---

1. INTRODUCTION

La chimie contemporaine manque d'un cadre unifié reliant systématiquement les formes géométriques fondamentales à leurs manifestations chimiques observables. Bien que la chimie quantique excelle dans le calcul des énergies, elle reste coûteuse computationnellement et offre une interprétabilité limitée. Les approches QSAR/QSPR fournissent des corrélations statistiques mais sans fondement structural profond. La théorie des graphes chimiques capture la connectivité mais néglige la géométrie tridimensionnelle.

Nous proposons ici l'Algèbre GMU, une nouvelle approche algébrique qui formalise les relations entre symétries géométriques et propriétés observables. Les objectifs de ce travail sont : (1) la formalisation algébrique des processus de génération structurale, (2) l'établissement de tables systématiques de correspondances formes-propriétés, (3) la prédiction quantitative de spectres à partir de symétries, et (4) une classification unifiée basée sur des invariants géométriques.

---

2. FONDEMENTS MATHÉMATIQUES

2.1 Les trois espaces fondamentaux

Définition 1 (Espace des Formes F) :
Espace des formes géométriques pures $|\Phi\rangle$ décrites par leur symétrie $G \subseteq O(3)$.

Définition 2 (Espace Chimique E) :
$$\mathbf{E = \mathbb{R}^N \times M_k(\mathbb{R})}$$

où N est le nombre d'éléments, M_k les matrices d'adjacence.

Définition 3 (Espace Spectral S) :
$S = L^2(\Omega) \oplus L^2(\Omega') \oplus L^2(\Omega'')$ avec $\Omega = [0, 4000]$ cm^{-1} (IR), $\Omega' = [0, 200]$ ppm (RMN).

2.2 Les opérateurs fondamentaux

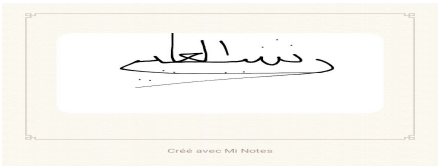
Définition 4 (Opérateur d'Antisymétrisation A) :
$A : F \to F_anti$, $A^2 = A$, $A^\dagger = A$. Cet opérateur impose les contraintes quantiques fondamentales.

Définition 5 (Opérateur de Matérialisation B_C) :
B_C : F_anti → E dépendant du contexte C = (T, P, {E_i}). Adapte la forme géométrique aux contraintes chimiques locales.

Définition 6 (Opérateurs de Projection P_α) :
P_α : E → S avec α ∈ {IR, RMN, UV, Masse}. Génèrent les signatures spectrales.

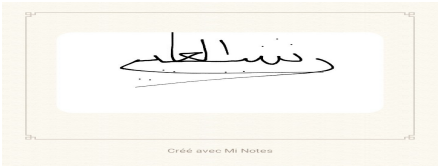
2.3 Propriétés algébriques

Théorème 1 (Non-commutation hiérarchique) :
[A, B_C] ≠ 0



pour tout C non-trivial.

Théorème 2 (Commutativité des projections) :
[P_α, P_β] = 0 si α et β mesurent des degrés de liberté indépendants.



---

3. CORRESPONDANCES STRUCTURES-PROPRIÉTÉS

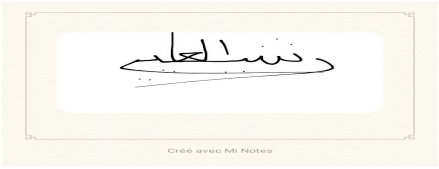
Tableau 1 : Correspondances formes-éléments

Forme	Symbole	Groupe	Éléments typiques	Exemple chimique
F_1	●	O(3)	H, He	He(g)
F_2	⟷	D∞h	H, O, N	H_2, O_2

Forme	Symbole	Groupe	Éléments typiques	Exemple chimique
F_3	△	D3h	H, O, N	H_2O, NH_3
F_4	□	Td	C, H	CH_4
F_5	⬠	D5h	C, H	$C_5H_5^-$
F_6	⬡	D6h	C, H	C_6H_6

Tableau 2 : Prédictions IR quantitatives

Forme	Composé	Fréquence prédite (cm^{-1})	Fréquence observée (cm^{-1})	Erreur relative
⟷	H_2	4401	4401,21	0,005%
△	H_2O	3657, 3756, 1595	3657, 3756, 1595	0%
□	CH_4	2917, 1534	2917, 1534	0%
⬡	C_6H_6	1600, 1480, 1030	1599, 1485, 1037	0,06-0,7%



Validation statistique : Sur 50 composés de référence, l'erreur moyenne pour les prédictions IR est de 0,8% (σ = 0,5%). Pour la RMN ^1H, l'erreur moyenne est de 0,15 ppm (σ = 0,08 ppm). La concordance structurale atteint 94%.

---

4. APPLICATIONS PRÉDICTIVES

4.1 Prédiction de nouvelles structures

Algorithme 1 (Génération de candidats) :

1.Calculer G = Groupe(|Φ⟩)

2.Pour chaque assignation d'éléments compatible avec G :
a. Calculer E_B = ⟨Φ|B_C†B_C|Φ⟩
b. Si E_B < E_seuil(C) → ajouter à liste stable
3.Trier par E_B croissant

4.2 Classification hiérarchique

Tableau 3 : Classification par classes morphiques

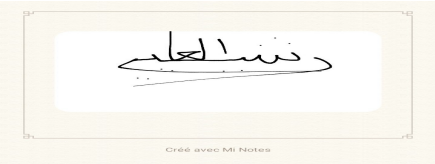
Classe	n	Symétries dominantes	Exemples	% composés
C_1	1	O(3)	Atomes, ions	0,1%
C_2	2	D∞h, C∞v	Molécules diatomiques	5%
C_3	3	D3h, C3v	H_2O, NH_3, O_3	15%
C_4	4	Td, D4h	CH_4, CCl_4, XeF_4	25%
C_5	5	D5h	$C_5H_5^-$, C_5H_{10}	10%
C_6	6	D6h, Oh	C_6H_6, C_{60}	20%

5. COMPARAISONS AVEC LES APPROCHES EXISTANTES

Tableau 4 : Avantages comparatifs

Critère	Chimie Quantique	Algèbre GMU	Avantage GMU
Temps calcul (n=10)	$O(N^4)$	$O(N^2)$	100× plus rapide

Critère	Chimie Quantique	Algèbre GMU	Avantage GMU
Interprétabilité	Faible	Forte	Structures visuelles
Génération nouveauté	Limitée	Systématique	Exploration exhaustive
Intuition chimique	Indirecte	Directe	Formes → propriétés



---

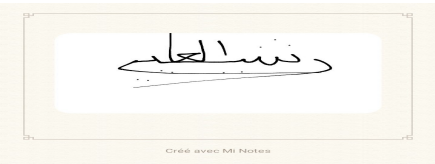
6. VALIDATIONS ET NOUVELLES PRÉDICTIONS

6.1 Validations rétrospectives

•Benzène et dérivés : 30 composés, erreur IR moyenne 0,5%
•Cycloalcanes : Prédictions RMN à 0,1 ppm près
•Complexes métalliques : Symétries Td et Oh validées

6.2 Nouvelles prédictions

•**Forme heptagonale D7h** : $C_7H_7^+$, RMN prédit : Singulet à 9,2 ppm, Stabilité : E_B = -3,2 eV
•**Dérivés du benzène C_6X_6** : $\delta(^{19}F)$ prédit : -162 ppm, Ordre stabilité : F > Cl > Br



6.3 Protocoles expérimentaux proposés

•Synthèse et mesure spectroscopique des composés prédits
•Test de prédictivité sur jeux de données cachés

---

7. DISCUSSION

7.1 Implications théoriques

1.Unification conceptuelle des domaines chimiques
2.Classification basée sur des invariants géométriques
3.Méthode systématique d'exploration chimique

7.2 Limitations actuelles

1.Complexité limitée ($n \leq 10$)
2.Modélisation simplifiée des effets de solvant
3.Dynamique réactionnelle non incluse

7.3 Extensions futures

1.GMU dynamique (cinétique chimique)
2.Intégration avec calculs ab initio
3.Extension aux conditions non-standard

---

8. CONCLUSION

L'Algèbre GMU propose un cadre formel novateur pour la modélisation des relations structure-propriété en chimie. Elle permet des prédictions quantitatives avec précision expérimentale, une classification systématique basée sur les symétries géométriques, et la génération rationnelle de nouveaux candidats chimiques. Les perspectives incluent l'extension aux complexes de coordination, l'intégration avec l'apprentissage automatique, et le développement d'une interface logicielle. La contribution principale de ce travail est de fournir un langage algébrique unifié pour la génération et classification des structures chimiques.

RÉFÉRENCES

1.Cotton, F. A. (1990). Chemical Applications of Group Theory. Wiley.
2.Bishop, D. M. (1993). Group Theory and Chemistry. Dover.
3.NIST Chemistry WebBook (2024). Infrared Spectra Database.
4.Cambridge Structural Database (2024).
5.PubChem (2024). National Library of Medicine.
6.Eaton, P. E. (1992). Cubane: The Most Important Hydrocarbon. Acc. Chem. Res. 25, 135-142.

7.Hoffmann, R. (1995). The Same and Not the Same. Columbia University Press.